第27卷 第2期 工 程 数 学 学 报 Vol. 27 No. 2
2010年04月 CHINESE JOURNAL OF ENGINEERING MATHEMATICS Apr. 2010

文章编号:1005-3085(2010)02-0207-12

分数阶 Nernst-Planck 方程的有限差分/谱元法求解*

李娴娟， 许传炬

(厦门大学数学科学学院，厦门 361005)

摘 要: Nernst-Planck 方程是用来描述在离子浓度梯度 ∇C 及电场 ∇V 共同存在的情况下，穿过渗透膜的离子(如钙，钾，钠，氯，镁等)流 J 的方程。但是，计算 Nernst-Planck 方程的数值解会遇到一些困难。本文考虑用以描述神经细胞中离子反常扩散现象的电缆型简化的分数阶 Nernst-Planck 方程，提出了一个时间有限差分/空间谱元法对该方程进行数值求解。我们给出了数值方法的详细构造过程以及实现方法。结果表明数值解在空间方向上具有指数阶收敛精度，在时间方向上具有 $2-\alpha$ 阶精度。最后，通过计算一个具有实际背景参数的问题说明所提方法的潜在应用。

关键词: 分数阶 Nernst-Planck 方程；谱元法；有限差分法；Newton-Krylov 迭代法

分类号: AMS(2000) 35S10; 35A05; 65M70; 65M12; 92C37 **中图分类号**: O241.8 **文献标识码**: A

1 引言

细胞生命活动过程中伴随的电现象，主要由存在于细胞膜两侧的电位差(称为膜电位，membrane potential)来刻画。跨膜电位差形成的一个主要原因就是细胞膜上存在选择性离子通道，大多只允许特定的离子通过。在电扩散过程中，一方面，根据 Fick 定律离子要从浓度高的区域往浓度低的区域扩散；另一方面，由 Kohlrausch 定律，带电粒子在电场力的作用下有漂移速度。在这两种力的作用下，神经细胞中离子的流通量为[1]

$$J_{\rm i}=-\nu_{\rm i}\Big(\nabla C_{\rm i}+\frac{z_{\rm i}F}{RT}C_{\rm i}\nabla V\Big),$$

其中 V 是电势差，$J_{\rm i}$ 为离子 i 的流量，$\nu_{\rm i}$ 表示扩散常数，$C_{\rm i}$ 是离子浓度，$z_{\rm i}$ 是化合价，F 是法拉第常数，R 是理想气体常数，T 是绝对温度。

每一种离子都遵守质量守恒定律，于是得到下面的 Nernst-Planck 方程 (N-P 方程)

$$\frac{\partial C_{\rm i}}{\partial t}+\nabla\cdot J_{\rm i}=0.$$

实际的 Nernst-Planck 方程是三维的，计算难度较大。为了简化模型，许多研究考虑细长神经元情形，引进所谓的电缆 (Cable) 模型。如 Qian 和 Sejnowski[2] 所提到的，为了使问题简化，我们考虑一个细长的电缆模型，假定轴方向的电流和离子浓度在圆柱的横截面上是一致的，并且横截面方向的电流只在圆柱表面存在与绕圆柱轴心的辐角无关。这些假设使得电扩散问题简化为沿着圆柱轴心的一维问题，此时在刺激电流 $I_{s,{\rm i}}$ 下方程可写为[2]

$$\frac{\partial C_{\rm i}}{\partial t}-\nu_{\rm i}\frac{\partial^2 C_{\rm i}}{\partial x^2}-\frac{z_{\rm i}\nu_{\rm i}F}{RT}\frac{\partial}{\partial x}\Big(C_{\rm i}\frac{\partial V}{\partial x}\Big)=-\frac{4}{dFz_{\rm i}}I_{m,{\rm i}}-I_{s,{\rm i}}, \tag{1}$$

收稿日期: 2009-05-22. 作者简介: 李娴娟 (1982年6月生)，女，博士. 研究方向：偏微分方程数值解.

*基金项目: 国家自然科学基金 (10531080)；973 “高性能科学计算研究” 项目 (2005CB321703)；福建省自然科学基金 (S0750017).

其中 $I_{m,\mathrm{i}}$ 是离子 i 的电流密度 (规定向外为正)，$I_{s,\mathrm{i}}$ 是刺激电流密度，d 是电缆圆截面的直径。

为了使系统封闭，要加上一个与电势差相关的方程

$$V(x,t)=V_0+\frac{Fd}{4C_m}\sum_{\mathrm{i}}\big(C_{\mathrm{i}}(x,t)-C_{\mathrm{i},0}\big)z_{\mathrm{i}}, \tag{2}$$

其中 V_0 是初始电势差，$C_{\mathrm{i},0}$ 是离子 i 的初始浓度，C_m 是单位面积的细胞膜电容。

方程 (1)-(2) 的计算已有许多成熟的方法。最近，Barkai 等人[3] 根据实验中发现的反常扩散现象导出分数阶的 Fokker-Planck 方程。事实上，更早一些的研究如 Metzler 等人[4] 也发现存在类似的现象。初边值问题的分数阶 Nernst-Planck 方程具有如下形式

$$\frac{\partial C_{\mathrm{i}}}{\partial t}={}^{R}D_t^{1-\alpha}\Big(\nu_{\mathrm{i}}\frac{\partial^2 C_{\mathrm{i}}}{\partial x^2}+\frac{z_{\mathrm{i}}\nu_{\mathrm{i}}F}{RT}\frac{\partial}{\partial x}\Big(C_{\mathrm{i}}\frac{\partial V}{\partial x}\Big)-\frac{4}{Fdz_{\mathrm{i}}}I_{m,\mathrm{i}}\Big)-I_{s,\mathrm{i}}, \tag{3}$$

且满足初始条件

$$C_{\mathrm{i}}(x,0)=C_{\mathrm{i},0}(x),\quad V(x,0)=V_0(x),\quad \forall\, x\in\Omega, \tag{4}$$

和边界条件

$$C_{\mathrm{i}}(x,t)|_{\partial\Omega}=C_{\mathrm{i},0}(x)|_{\partial\Omega},\quad V(x,t)|_{\partial\Omega}=V_0(x)|_{\partial\Omega},\quad \forall\, t\in I, \tag{5}$$

其中 ${}^{R}D_t^{1-\alpha}$, $0<\alpha<1$，表示关于时间变量 t 的 $1-\alpha$ 阶 Riemann-Liouville 分数阶导数[5]

$${}^{R}D_t^{1-\alpha}v(t)=\frac{1}{\Gamma(\alpha)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_0^t\frac{v(\tau)\mathrm{d}\tau}{(t-\tau)^{1-\alpha}},\quad \forall\, t\in[0,T].$$

我们考虑 K^+ 和 Na^+ 两种离子的情形，即 $\mathrm{i}=K^+$, Na^+。下面描述的方法可以直接应用到多种离子情形。这两种离子的膜通量如下[6]

$$I_{m,\mathrm{Na}^+}=g_{\mathrm{Na}}m^3h(V-V_{\mathrm{Na}}),\quad I_{m,\mathrm{K}^+}=g_{\mathrm{K}}n^4(V-V_{\mathrm{K}}),$$

其中 g_{Na} 和 g_{K} 分别表示最大钾和钠电导，V_{Na} 和 V_{K} 分别是钠和钾平衡电势。无量纲变量 m, n, h 满足如下的一阶常微分方程

$$\frac{\mathrm{d}m}{\mathrm{d}t}=\alpha_m(1-m)-\beta_m m,\quad \frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}t}=\alpha_n(1-n)-\beta_n n,\quad \frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}t}=\alpha_h(1-h)-\beta_h h,$$

其中

$$\alpha_m=\frac{0.1(V+25)}{\exp(\frac{V+25}{10}-1)},\quad \alpha_n=\frac{0.01(V+10)}{\exp(\frac{V+10}{10}-1)},\quad \alpha_h=0.07\exp\Big(\frac{V}{20}\Big),$$

$$\beta_m=4\exp\Big(\frac{V}{18}\Big),\quad \beta_n=0.125\exp\Big(\frac{V}{10}\Big),\quad \beta_h=\frac{1}{\exp(\frac{V+30}{10}+1)}.$$

表 1 列出了各种量纲和求解方程所需的一些参数。初值条件是静止状态下的条件。

表 1: N-P 方程中未知量的量纲和一些参数

变量	参数/量纲	变量	参数/量纲
t	ms	$\mathrm{C_m}$	$1.0\mu\mathrm{F/cm^2}$
x	cm	R	$8.3\mathrm{J/mol\cdot k}$
C_i	mM	F	$9.6485\times 10^7\mathrm{mc/mol}$
V	mv	T	293 K
ν_Na	$3.47\times10^{-8}\mathrm{cm^2/ms}$	$I_{s,\mathrm{Na}}$	$0.005\mu\mathrm{a}$
ν_K	$5.11\times10^{-8}\mathrm{cm^2/ms}$	$I_{s,\mathrm{K}}$	$0.005\mu\mathrm{a}$
V_Na	115 mv	$C_{\mathrm{Na},0}$	12 mmol/L
V_K	-12 mv	$C_{\mathrm{K},0}$	140 mmol/L
g_Na	$120\,\mathrm{mmol/cm^2}$	z_Na	+1
g_K	$36\,\mathrm{mmol/cm^2}$	z_K	+1
V_0	-78 mv		

将 Riemann-Liouville 分数阶积分算子 $I_t^{1-\alpha}$ 作用于 (3) 的两边，并利用分数阶微积分组合性质得到[5]

$$\begin{cases} D_t^\alpha C_\mathrm{i} - \nu_\mathrm{i}\dfrac{\partial^2 C_\mathrm{i}}{\partial x^2} - \dfrac{z_\mathrm{i}\nu_\mathrm{i}F}{RT}\dfrac{\partial}{\partial x}\Big(C_\mathrm{i}\dfrac{\partial V}{\partial x}\Big) = -\dfrac{4}{dFz_\mathrm{i}}I_{m,\mathrm{i}} - \tilde{I}_{s,\mathrm{i}}, \quad \mathrm{i}=\mathrm{K}^+,\,\mathrm{Na}^+, \\ V = V_0 + \dfrac{Fd}{4C_m}\displaystyle\sum_\mathrm{i}(C_\mathrm{i}-C_{\mathrm{i},0})z_\mathrm{i}, \end{cases} \tag{6}$$

其中 D_t^α 表示 α 阶 Caputo 导数[5]，$\tilde{I}_{s,\mathrm{i}} = I_t^{1-\alpha}I_{s,\mathrm{i}}$。

目前已有一些关于整数阶 Nernst-Planck 方程数值计算的研究工作。如 Qian[2] 提出时间方向用一阶差分，空间方向用中心差分对 Nernst-Planck 方程进行离散。Samson 等人[7] 用有限差分/有限元法求解扩展的 Poisson-Nernst-Planck 方程。但是分数阶方程的求解与整数阶相比具有本质的不同。本文将提出一个在时间方向上采用高阶有限差分法，空间方向上采用谱元法对分数阶 Nernst-Planck 方程数值求解。

2 有限差分/谱元法

本节详细描述我们的方法。

2.1 时间离散：有限差分格式

对于给定的正整数 $M>0$，令 $t_n = n\Delta t,\ n=0,1,\cdots,M$，其中时间步长 $\Delta t = \frac{T}{M}$。那么对所有的 $0\le n\le M$，我们采用如下差分格式逼近分数阶时间导数

$$\begin{aligned} D_t^\alpha f(t_{n+1}) &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)}\sum_{j=0}^{n}\int_{t_j}^{t_{j+1}}\frac{\partial_\tau f(\tau)}{(t_{n+1}-\tau)^\alpha}\mathrm{d}\tau \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)}\sum_{j=0}^{n}\frac{f(t_{j+1})-f(t_j)}{\Delta t}\int_{t_j}^{t_{j+1}}(t_{n+1}-\tau)^{1-\alpha}\mathrm{d}\tau + r_\alpha^{n+1} \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{\Delta t^{\alpha}\Gamma(2-\alpha)}\sum_{j=0}^{n}\big(f(t_{j+1})-f(t_j)\big)\big((n+1-j)^{1+\alpha}-(n-j)^{1-\alpha}\big)+r_{\alpha}^{n+1}\\
&= \frac{1}{\Delta t^{\alpha}\Gamma(2-\alpha)}\sum_{j=0}^{n}\big(f(t_{n-j+1})-f(t_{n-j})\big)\big((1+j)^{1-\alpha}-j^{1-\alpha}\big)+r_{\alpha}^{n+1}\\
&= \beta_0\sum_{j=0}^{n}b_j\big(f(t_{k-j+1})-f(t_{n-j})\big)+r_{\alpha}^{n+1},
\end{aligned}
\tag{7}
$$

这里 $b_j=(j+1)^{1-\alpha}-j^{1-\alpha}$，$\beta_0=\frac{1}{\Delta t^{\alpha}\Gamma(2-\alpha)}$，$r_{\alpha}^{n+1}$ 为截断误差项。

引理 1[8] 格式 (7) 的截断误差为

$$
r_{\alpha}^{n+1}\le O(\Delta t^{2-\alpha}).
$$

将差分格式 (7) 用于方程 (6) 中的 $D_t^{\alpha}C(x,t_{n+1})$ 项，将二阶 Adams-Bashforth 格式用于 $I_{m,\mathrm{i}}$ 项，其它的非线性项进行隐式处理，得到如下的半离散格式

$$
\begin{cases}
\beta_0 C_{\mathrm{i}}^{n+1}-\nu_{\mathrm{i}}\dfrac{\partial^2 C_{\mathrm{i}}^{n+1}}{\partial x^2}-\dfrac{z_{\mathrm{i}}\nu_{\mathrm{i}}F}{RT}\dfrac{\partial}{\partial x}\Big(C_{\mathrm{i}}^{n+1}\dfrac{\partial V^{n+1}}{\partial x}\Big)=\beta_0\displaystyle\sum_{j=0}^{n-1}(b_j-b_{j+1})C_{\mathrm{i}}^{n-j}\\
\qquad -\beta_0 b_n V^0+\dfrac{4}{dFz_{\mathrm{i}}}(2I_{m,\mathrm{i}}^{n}-I_{m,\mathrm{i}}^{n-1})-\tilde{I}_{s,\mathrm{i}}^{n+1},\quad \mathrm{i}=\mathrm{K}^+,\mathrm{Na}^+,\\
V^{n+1}=V^0+\dfrac{Fd}{4C_m}\displaystyle\sum_{\mathrm{i}}(C_{\mathrm{i}}^{n+1}-C_{\mathrm{i}}^{0})z_{\mathrm{i}},
\end{cases}
\tag{8}
$$

其中 V^{n+1} 逼近 $V(x,t_{n+1})$，C_{i}^{n+1} 逼近 $C_{\mathrm{i}}(x,t_{n+1})$，$V^0=V_0$，$C_{\mathrm{i}}^0=C_{\mathrm{i},0}$。方程 (8) 以及边界条件 (5) 和初始条件 (4) 构成一个完整的半离散问题。

2.2 空间谱离散

为了更好地模拟在给定的位置注入刺激电流引起的离子扩散，我们用 Legendre 谱元法进行空间离散。使用谱元法的优点之一是：通过区域剖分，可以选择适当的剖分点使得在刺激点附近有足够多的节点来模拟刺激电流。

记 $L^2(\Lambda)$ 为 Λ 上的 Lebesgue 平方可测函数空间，相应的内积为 $(u,v)=\int_{\Lambda}uv\mathrm{d}x$。$H^m(\Lambda)$，$H_0^m(\Lambda)$ 为标准的 Sobolev 空间。

考虑问题 (8),(5) 的弱形式：求 $C_{\mathrm{i}}^{n+1}\in(H_0^1(\Lambda))^2$，$V^{n+1}\in H_0^1(\Lambda)$，使得对任意的 $W\in H_0^1(\Lambda)$ 满足

$$
\begin{cases}
\beta_0(C_{\mathrm{i}}^{n+1},W)+\nu_{\mathrm{i}}\Big(\dfrac{\partial C_{\mathrm{i}}^{n+1}}{\partial x},\dfrac{\partial W}{\partial x}\Big)\\
\qquad +\frac{z_{\mathrm{i}}\nu_{\mathrm{i}}F}{RT}\Big(C_{\mathrm{i}}^{n+1}\frac{\partial V^{n+1}}{\partial x},\frac{\partial W}{\partial x}\Big)=\big(Y_{\mathrm{i}}^{n+1},W\big),\quad \mathrm{i}=\mathrm{K}^+,\mathrm{Na}^+,\\
(V^{n+1},W)-\dfrac{Fd}{4C_m}\Big(\displaystyle\sum_{\mathrm{i}}C_{\mathrm{i}}^{n+1}z_{\mathrm{i}},W\Big)=(\tilde{V}^0,W),
\end{cases}
\tag{9}
$$

其中

$$Y_{\rm i}^{n+1}=\beta_0\sum_{j=0}^{n-1}(b_j-b_{j+1})C_{\rm i}^{n-j}+\beta_0 b_n V^0-\frac{4}{dFz_{\rm i}}(2I_{m,{\rm i}}^n-I_{m,{\rm i}}^{n-1})-\tilde{I}_{s,{\rm i}},$$

$$\tilde{V}^0=V^0-\frac{Fd}{4C_m}\sum_{\rm i}C_{\rm i}^0 z_{\rm i}.$$

我们将要构造的谱元法基于标准的Galerkin方法。为此，先进行网格剖分，在区间Λ中选取$K+1$个点，从左到右依次编号为$a=a_0<a_1<\cdots<a_K=b$，这样区间Λ就被分成K个互不相交的子区间$\Lambda_k=(a_{k-1},a_k)$，它们满足$\overline{\Lambda}=\bigcup_{k=1}^K\overline{\Lambda}_k$。定义$\hat{\Lambda}=(-1,1)$为参考区间，显然存在一个从$\hat{\Lambda}$到$\Lambda_k$的一一映射$F_k$

$$x=F_k(r)=l_k(r+1)/2+a_{k-1},\quad r\in\hat{\Lambda},\quad l_k=a_k-a_{k-1}.$$

Galerkin谱离散基本思想在于用高阶多项式来逼近解。为此，定义Λ上的分片多项式空间为

$$P_N^K(\Lambda)=\big\{v\mid v\circ F_k(\hat{\Lambda})\in P_N(\hat{\Lambda}),\ k=1,\cdots,K\big\},$$

其中$P_N(\hat{\Lambda})$为$\hat{\Lambda}$上阶数不超过N的多项式空间。

令逼近空间$\mathcal{V}_N=P_N^K(\Lambda)\cup H_0^1(\Lambda)$。我们考虑问题(9)的Galerkin谱离散如下，求$C_{{\rm i},N}^{n+1}\in\mathcal{V}_N^2,V_N^{n+1}\in\mathcal{V}_N$，使得对于任意的$W_N\in\mathcal{V}_N$满足

$$\begin{cases}\beta_0\big(C_{{\rm i},N}^{n+1},W_N\big)+\nu_{\rm i}\Big(\dfrac{\partial C_{{\rm i},N}^{n+1}}{\partial x},\dfrac{\partial W_N}{\partial x}\Big)\\[2mm] \quad+\dfrac{z_{\rm i}\nu_{\rm i}F}{RT}\Big(C_{{\rm i},N}^{n+1}\dfrac{\partial V_N^{n+1}}{\partial x},\dfrac{\partial W_N}{\partial x}\Big)=\big(Y_{{\rm i},N}^{n+1},W_N\big),\quad {\rm i}={\rm K}^+,{\rm Na}^+,\\[2mm] \big(V_N^{n+1},W_N\big)-\dfrac{Fd}{4C_m}\Big(\sum_{\rm i}C_{{\rm i},N}^{n+1}z_{\rm i},W_N\Big)=\big(\tilde{V}^0,W_N\big),\end{cases}\tag{10}$$

其中

$$Y_{{\rm i},N}^{n+1}=\beta_0\sum_{j=0}^{n-1}(b_j-b_{j+1})C_{{\rm i},N}^{n-j}+\beta_0 b_n V^0-\frac{4}{dFz_{\rm i}}(2I_{m,{\rm i}}^n-I_{m,{\rm i}}^{n-1})-\tilde{I}_{s,{\rm i}}.$$

3 计算实施

Galerkin逼近问题(10)实现起来比较困难，因为精确计算(10)中的积分很费时。一种代替方案是用数值积分取代精确积分。由于Gauss-Lobatto数值积分所具有的高精度，我们选择用它近似(10)中的积分。在区间$\hat{\Lambda}$上的Gauss-Lobatto积分公式为

$$\int_{\hat{\Lambda}}\phi(r){\rm d}r\approx\sum_{i=0}^N\phi(\xi_i)\omega_i,$$

其中ξ_i是Gauss-Lobatto-Legendre(GLL)点，ω_i是相应的积分权值。上述积分对任意的$\phi\in P_{2N-1}(\hat{\Lambda})$是精确成立的。$\Lambda_k$上的GLL积分可通过变量变换得到

$$(u,v)_{\Lambda_k}=\int_{\hat{\Lambda}}(uv)\circ F_k(r)\frac{l_k}{2}{\rm d}r\approx\sum_{i=0}^N(uv)\circ F_k(\xi_i)\frac{l_k}{2}\omega_i.$$

记 $\xi_i^k = F_k(\xi_i)$，$\omega_i^k = \frac{l^k}{2}\omega_i$，则 ξ_i^k 为 Λ_k 的 GLL 点。定义 Λ 上的离散内积为

$$(u,v)_N = \sum_{k=1}^{K}(u,v)_{\Lambda_k,N},$$

其中

$$(u,v)_{\Lambda_k,N} = \sum_{i=0}^{N} u(\xi_i^k)v(\xi_i^k)\omega_i^k.$$

将 (10) 中的内积用离散的内积代替，得到一个近似问题：求 $C_{\mathrm{i},N}^{n+1} \in \mathcal{V}_N^2$，$V_N^{n+1} \in \mathcal{V}_N$，使得对于任意的 $W_N \in \mathcal{V}_N$，满足

$$\begin{cases} \beta_0\left(C_{\mathrm{i},N}^{n+1}, W_N\right)_N + \nu_{\mathrm{i}}\left(\dfrac{\partial C_{\mathrm{i},N}^{n+1}}{\partial x}, \dfrac{\partial W_N}{\partial x}\right)_N \\ \quad + \dfrac{z_{\mathrm{i}}\nu_{\mathrm{i}}F}{RT}\left(C_{\mathrm{i},N}^{n+1}\dfrac{\partial V_N^{n+1}}{\partial x}, \dfrac{\partial W_N}{\partial x}\right)_N = \left(Y_{\mathrm{i},N}^{n+1}, W_N\right)_N, \quad \mathrm{i} = \mathrm{K}^+, \mathrm{Na}^+, \\ \left(V_N^{n+1}, W_N\right)_N - \dfrac{Fd}{4C_m}\left(\sum_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i},N}^{n+1} z_{\mathrm{i}}, W_N\right)_N = \left(\tilde{V}^0, W_N\right)_N. \end{cases} \tag{11}$$

由 (11) 可推导最终求解的代数方程组，具体如下定义

$$h_i(r) = \prod_{j=0,j\neq i}^{N} \frac{r-\xi_i}{\xi_i-\xi_j}, \quad i = 0,1,\cdots,N.$$

显然 h_i 满足 $h_i(\xi_j) = \delta_{ij}$ (δ_{ij} 为 Kronecker 符号)，且对任意的 $v_N \in P_N(\hat{\Lambda})$，有

$$v_N(r) = \sum_{i=0}^{N} v_N(\xi_i)h_i(r).$$

令 $F_k^{-1}(x)$ 为 F_k 的逆映射，定义 $h_i^k(x) = h_i \circ F_k^{-1}(x)$。容易看出，$h_i^k$ 有如下形式

$$h_i^k(x) = \prod_{j=0,j\neq i}^{N} \frac{x-\xi_i^k}{\xi_i^k-\xi_j^k}, \quad x \in \Lambda_k, \quad i = 0,1,\cdots,N, \quad k = 1,\cdots,K.$$

因此 $h_i^k(\xi_j^k) = \delta_{ij}$。$h_i^k(x)$ 称为 V_N 在 Λ_k 上的一组局部基。将 $C_{\mathrm{i},N}^{n+1}$ 和 V_N^{n+1} 用这些基函数展开

$$C_{\mathrm{i},N}^{n+1}(x) = \sum_{k=1}^{K}\sum_{i=0}^{N} C_{\mathrm{i},N}^{n+1}(\xi_i^k)h_i^k(x),$$

$$V_N^{n+1}(x) = \sum_{k=1}^{K}\sum_{i=0}^{N} V_N^{n+1}(\xi_i^k)h_i^k(x),$$

$$Y_{\mathrm{i},N}^{n+1}(x) = \sum_{k=1}^{K}\sum_{i=0}^{N} Y_{\mathrm{i},N}^{n+1}(\xi_i^k)h_i^k(x), \quad \mathrm{i} = \mathrm{K}^+, \mathrm{Na}^+,$$

代入 (11)，并让检验函数 W_N 取遍所有的 $h_j^k(x)$, $j=1,\cdots,N-1$, $k=1,\cdots,K$，我们得到一个非线性方程组

$$\begin{aligned} &M\boldsymbol{c}_{\rm i}+D^TE_{\rm i}D\boldsymbol{c}_{\rm i}+D^TG_{\rm i}P_{\rm i}D\boldsymbol{v}=\boldsymbol{y}_{\rm i}, \quad {\rm i}={\rm K}^+,{\rm Na}^+,\\ &M\boldsymbol{v}-\textstyle\sum_{\rm i}Q_{\rm i}\boldsymbol{c}_{\rm i}=\boldsymbol{v}^0, \end{aligned} \tag{12}$$

其中

$$\boldsymbol{c}_{\rm i}=\big(C_{{\rm i},N}^{n+1}(\xi_0^1),C_{{\rm i},N}^{n+1}(\xi_1^1),\cdots,C_{{\rm i},N}^{n+1}(\xi_N^1),\cdots,C_{{\rm i},N}^{n+1}(\xi_N^K)\big)^T, \quad {\rm i}={\rm K}^+,{\rm Na}^+,$$
$$\boldsymbol{v}=\big(V_N^{n+1}(\xi_0^1),V_N^{n+1}(\xi_1^1),\cdots,V_N^{n+1}(\xi_N^1),\cdots,V_N^{n+1}(\xi_N^K)\big)^T,$$

是 $(N+1)K$ 阶未知量。$\boldsymbol{v}^0$, $\boldsymbol{y}_{\rm i}$ 类似定义

$$\boldsymbol{v}^0=\big(\tilde V^0(\xi_0^1)\omega_0^1,\cdots,\tilde V^0(\xi_N^1)\omega_N^2,\cdots,\tilde V^0(\xi_N^K)\omega_N^K\big)^T,$$
$$\boldsymbol{y}_{\rm i}=\big(Y_{{\rm i},N}^{n+1}(\xi_0^1)\omega_0^1,\cdots,Y_{{\rm i},N}^{n+1}(\xi_N^1)\omega_N^1,\cdots,Y_{{\rm i},N}^{n+1}(\xi_N^K)\omega_N^K\big)^T.$$

M, $Q_{\rm i}$, $E_{\rm i}$, $G_{\rm i}$ 为 $((N+1)K)\times((N+1)K)$ 阶对角矩阵，即

$$M={\rm diag}(M^k), \quad M^k={\rm diag}(\beta_0\omega_i^k), \quad k=1,\cdots,K, \quad i=0,\cdots,N,$$
$$Q_{\rm i}={\rm diag}(Q_{\rm i}^k), \quad Q_{\rm i}^k={\rm diag}\Big(\frac{Fdz_{\rm i}}{4C_m}\omega_i^k\Big), \quad P_{\rm i}={\rm diag}(P_{\rm i}^k), \quad P_{\rm i}^k={\rm diag}\big(C_{{\rm i},N}^{n+1}(\xi_i^k)\big),$$
$$E_{\rm i}={\rm diag}(E_{\rm i}^k), \quad E_{\rm i}^k={\rm diag}(\nu_{\rm i}\omega_i^k), \quad G_{\rm i}={\rm diag}(G_{\rm i}^k), \quad G_{\rm i}^k={\rm diag}\Big(\frac{Fz_{\rm i}\nu_{\rm i}}{RT}\omega_i^k\Big).$$

D 为 $((N+1)K)\times((N+1)K)$ 阶块对角矩阵，即

$$D={\rm diag}(D^k), \quad D_{ij}^k=\partial_x h_j^k(\xi_i^k), \quad k=1,\cdots,K, \quad i,j=0,\cdots,N.$$

方程 (12) 是一个非线性非对称系统，我们用 Jacobian-free Newton-Krylov 方法[9] 求解。为了便于应用该方法，重新写方程 (12) 如下

$$\mathcal{F}_{\rm i}(\boldsymbol{u}):=M\boldsymbol{c}_{\rm i}+D^TE_{\rm i}D\boldsymbol{c}_{\rm i}+D^TG_{\rm i}P_{\rm i}D\boldsymbol{v}-\boldsymbol{y}_{\rm i}=0, \quad {\rm i}={\rm K}^+,\,{\rm Na}^+,$$
$$\mathcal{F}_v(\boldsymbol{u}):=M\boldsymbol{v}-\sum_{\rm i}Q_{\rm i}\boldsymbol{c}_{\rm i}-\boldsymbol{v}^0=0,$$

其中

$$\boldsymbol{u}=\Big(\boldsymbol{c}_{\rm Na},\,\boldsymbol{c}_{\rm K},\,\boldsymbol{v}\Big)^T.$$

用 Jacobian-free Newton-Krylov 方法解非线性系统 (12) 的过程如下。

首先，给定一个初始值$\boldsymbol{u}^{(0)}$，用Bi-Conjugate-Gradient-stab (Bicgstab)[10]算法解关于增量$\delta\boldsymbol{u}$的线性系统

$$\mathcal{J}_{\mathcal{F}_\mathrm{i}}\big(\boldsymbol{u}^{(m)}\big)\delta\boldsymbol{u}=-\mathcal{F}_\mathrm{i}\big(\boldsymbol{u}^{(m)}\big),\quad \mathcal{J}_{\mathcal{F}_v}\big(\boldsymbol{u}^{(m)}\big)\delta\boldsymbol{u}=-\mathcal{F}_v\big(\boldsymbol{u}^{(m)}\big),$$

这里m是迭代步数，$\mathcal{J}_{\mathcal{F}_\mathrm{i}}(\boldsymbol{u}^{(m)})$是函数$\mathcal{F}_\mathrm{i}$在$\boldsymbol{u}^{(m)}$的Jacobian矩阵。实际计算中我们不需要形成矩阵$\mathcal{J}_{\mathcal{F}_\mathrm{i}}(\boldsymbol{u}^{(m)})$。事实上，Bicgstab算法需要的只是矩阵向量积。记$\mathrm{d}\mathcal{F}_\mathrm{i}(\boldsymbol{u}^{(m)},\delta\boldsymbol{u})$为函数$\mathcal{F}_\mathrm{i}$在$\boldsymbol{u}^{(m)}$点关于$\delta\boldsymbol{u}$方向的Fréchet导数，则

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}_{\mathcal{F}_\mathrm{i}}\big(\boldsymbol{u}^{(m)}\big)\delta\boldsymbol{u}&=\mathrm{d}\mathcal{F}_\mathrm{i}\big(\boldsymbol{u}^{(m)},\delta\boldsymbol{u}\big)\\
&=\lim_{\epsilon\to0}\frac{\mathcal{F}_\mathrm{i}\big(\boldsymbol{u}^{(m)}+\epsilon\delta\boldsymbol{u}\big)-\mathcal{F}_\mathrm{i}\big(\boldsymbol{u}^{(m)}\big)}{\epsilon}\\
&=\lim_{\epsilon\to0}\frac{M\big(\boldsymbol{c}_\mathrm{i}^{(m)}+\epsilon\delta\boldsymbol{c}_\mathrm{i}\big)-M\boldsymbol{c}_\mathrm{i}^{(m)}}{\epsilon}+\lim_{\epsilon\to0}\frac{D^TE_\mathrm{i}D\big(\boldsymbol{c}_\mathrm{i}^{(m)}+\epsilon\delta\boldsymbol{c}_\mathrm{i}\big)-D^TE_\mathrm{i}D\boldsymbol{c}_\mathrm{i}^{(m)}}{\epsilon}\\
&\quad+\lim_{\epsilon\to0}\frac{D^TG_\mathrm{i}(P_\mathrm{i}+\epsilon\delta P_\mathrm{i})D\big(\boldsymbol{v}^{(m)}+\epsilon\delta\boldsymbol{v}\big)-D^TG_\mathrm{i}P_\mathrm{i}D\boldsymbol{v}^{(m)}}{\epsilon}\\
&=M\delta\boldsymbol{c}_\mathrm{i}+D^TE_\mathrm{i}D\delta\boldsymbol{c}_\mathrm{i}+D^TG_\mathrm{i}P_\mathrm{i}D\delta\boldsymbol{v}+D^TG_\mathrm{i}P_vD\delta\boldsymbol{c}_\mathrm{i},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}_{\mathcal{F}_v}\big(\boldsymbol{u}^{(m)}\big)\delta\boldsymbol{u}&=\mathrm{d}\mathcal{F}_v(\boldsymbol{u}^{(m)},\delta\boldsymbol{u})\\
&=\lim_{\epsilon\to0}\frac{\mathcal{F}_v\big(\boldsymbol{u}^{(m)}+\epsilon\delta\boldsymbol{u}\big)-\mathcal{F}_v\big(\boldsymbol{u}^{(m)}\big)}{\epsilon}\\
&=\lim_{\epsilon\to0}\frac{M\big(\boldsymbol{v}^{(m)}+\epsilon\delta\boldsymbol{v}\big)-M\boldsymbol{v}^{(m)}}{\epsilon}-\lim_{\epsilon\to0}\frac{\sum\limits_\mathrm{i}Q_\mathrm{i}\big(\boldsymbol{c}_\mathrm{i}^{(m)}+\epsilon\delta\boldsymbol{c}_\mathrm{i}\big)-Q_\mathrm{i}\boldsymbol{c}_\mathrm{i}^{(m)}}{\epsilon}\\
&=M\delta\boldsymbol{v}-\sum_\mathrm{i}Q_\mathrm{i}\delta\boldsymbol{c}_\mathrm{i},
\end{aligned}$$

其中$P_v=\mathrm{diag}(P_v^k)$，$P_v^k=\mathrm{diag}(V_N^{n+1}(\xi_i^k))$，$k=1,\cdots,K$，$i=0,\cdots,N$。

最后，我们根据

$$\boldsymbol{u}^{(m+1)}=\boldsymbol{u}^{(m)}+\omega\delta\boldsymbol{u},$$

校正得到$\boldsymbol{u}^{(m+1)}$。因子$0<\omega\le1$是用来全局化上述迭代法的收敛性，最简单选择ω的准则是使非线性残量减小，即

$$\big\|\mathcal{F}(\boldsymbol{u}^{(m+1)})\big\|<(1-\lambda\omega)\big\|\mathcal{F}(\boldsymbol{u}^{(m)})\big\|.$$

取$\lambda=10^{-1}$，我们测试$\omega=1.0,\ 1/4,\ 1/16,\cdots$，直到满足上述不等式。Newton-Krylov迭代法终止条件是

$$\frac{\|\delta\boldsymbol{u}\|}{\|\boldsymbol{u}^{(m)}\|}<tol.$$

在计算中，取$tol=10^{-15}$。我们把t^n步的计算结果作为求解t^{n+1}步时的初始值，并取零作为Bicgstab迭代法的初始值。

4 数值实验

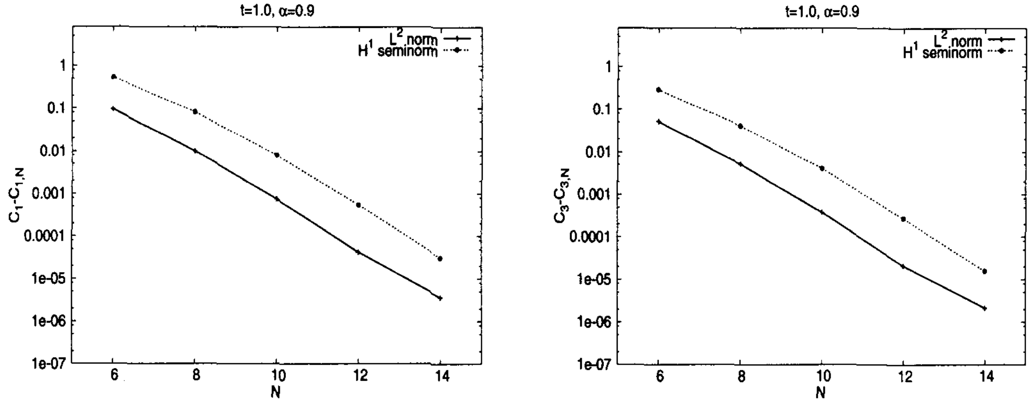
算例1 为了验证数值方法的有效性，我们首先考虑已知精确解的问题

$$
\begin{cases}
D_t^{\alpha} C_{\rm i} - \dfrac{\partial^2 C_{\rm i}}{\partial x^2} - \dfrac{\partial}{\partial x}\Big(C_{\rm i} \dfrac{\partial V}{\partial x} \Big) = f, \quad 0 < x < 3, \quad t > 0, \quad {\rm i} = 1, 2, \\
V = \displaystyle\sum_{{\rm i}=1}^{2} C_{\rm i},
\end{cases}
$$

其中选取 f 使得精确解为

$$
V = t^{1.2} \sin(\pi x/3), \quad C_1 = t^2 \sin(\pi x), \quad C_2 = t^{1.6} \sin(2\pi x/3).
$$

首先，我们考察空间方向上的误差。为此，先固定$\Delta t = 0.0001$，使得时间方向上的误差足够小。取$\alpha = 0.9$, $K = 1$，我们考察C_1和V在空间方向上的L^2和H^1范数误差的衰减情况。从图1(a)-(b)可看出，在半log尺度下(对纵坐标取log)，L^2和H^1范数误差与多项式阶数N呈线性关系，这表明数值解在空间方向是按指数阶收敛于精确解的。

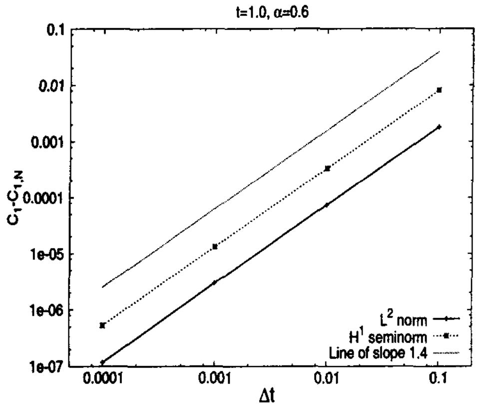


(a) (b)

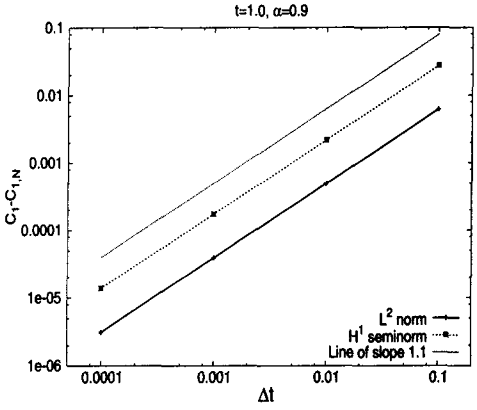
图 1: 误差随N的变化情况

其次，我们考察时间方向上的误差衰减速度。为此，先固定多项式阶数$N = 30$，单元个数$K = 1$，这样空间方向上的误差可以忽略不计。分别取$\alpha = 0.6$, 0.9，在图2(a)-(b)中，可看到在log尺度下(对横坐标和纵坐标同时取log) L^2和H^1范数误差与时间步长Δt呈线性关系。这表明精确解与数值解之间的误差在时间方向上是代数衰减的，且是$\Delta t^{2-\alpha}$阶收敛的，这与预计结果相符合。

算例2 我们计算具有实际背景参数的N-P方程，计算中所用到的参数见表1。在实际计算中，我们计算$C_{{\rm i},0} - C_{\rm i}$, $V_0 - V$的值，从而考察离子浓度和膜电位基于静息状态$C_{\rm i} = C_{{\rm i},0}$, $V = V_0$时的变化情况。为了使$C_{{\rm i},0} - C_{\rm i}$, $V_0 - V$满足齐次边界条件，在计算中我们选取足够大的计算区域$\Omega = (-4, 10)$，并将其平均剖分为14 ($K = 14$)个单元，每个单元用25 ($N = 25$)阶多项式来逼近，使得当在$x = 0$点注入电流时，其位置恰好在第四个单元和第五个单元交点处，有足够多的点来模拟刺激电流I_s。



(a)



(b)

图 2: 误差随 Δt 的变化情况

当 $\alpha = 1.0$ 时，分数阶 N-P 方程 (6) 简化为传统的 N-P 方程 (1)-(2)。我们采用二阶的向后差分/谱元法格式对 N-P 方程数值求解。图 3 是 Qian[2] 在时间上用一阶差分，空间上用中心差分对 N-P 方程数值求解的结果。取时间步长 $\Delta t = 10^{-2}$，图 4 (a), 4 (e) 描述了神经细胞中的膜电位在空间方向上和时间方向上的传导。两者吻合很好。

当 $0 < \alpha < 1$ 时，我们采用本文所提出的 $2-\alpha$ 阶有限差分/谱元法格式求解分数阶 N-P 方程，研究神经细胞中离子反常扩散时膜电位在时间和空间方向上的传导情况。由于膜电位的传导速度随 α 的减小而加快，这就意味着 V^{n+1} 与 V^n 的差值随着 α 的减小而变大，而我们把 t^n 步的计算结果 V^n 作为用 Newton 迭代法求解 V^{n+1} 的初始值，所以为了保证 Newton 迭代法的收敛速度，当 α 减小时，取较小的时间步长 $\Delta t = 10^{-3}$。我们分别取 $\alpha = 0.9, 0.8, 0.7$，图 4 (b)-(d) 中描绘了在 $x = 0, 1, 2, 3$ 不同位置膜电位随时间变化的传导情况，以及图 4 (f)-(h) 中描绘了在 $t = 0.5,\ 1.0,\ 2.0,\ 3.0$ 不同时刻膜电位随空间变化的传导情况。从图 4 (a)-(h) 中，我们看到神经细胞中离子反常扩散时膜电位的传导速度随 α 的减小而加快。

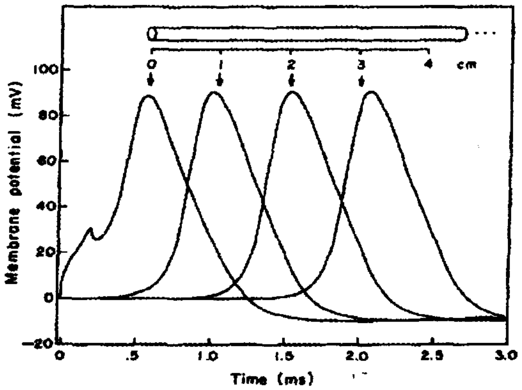


图 3: 文献 [2] 的结果：不同位置的膜电位随时间变化情况

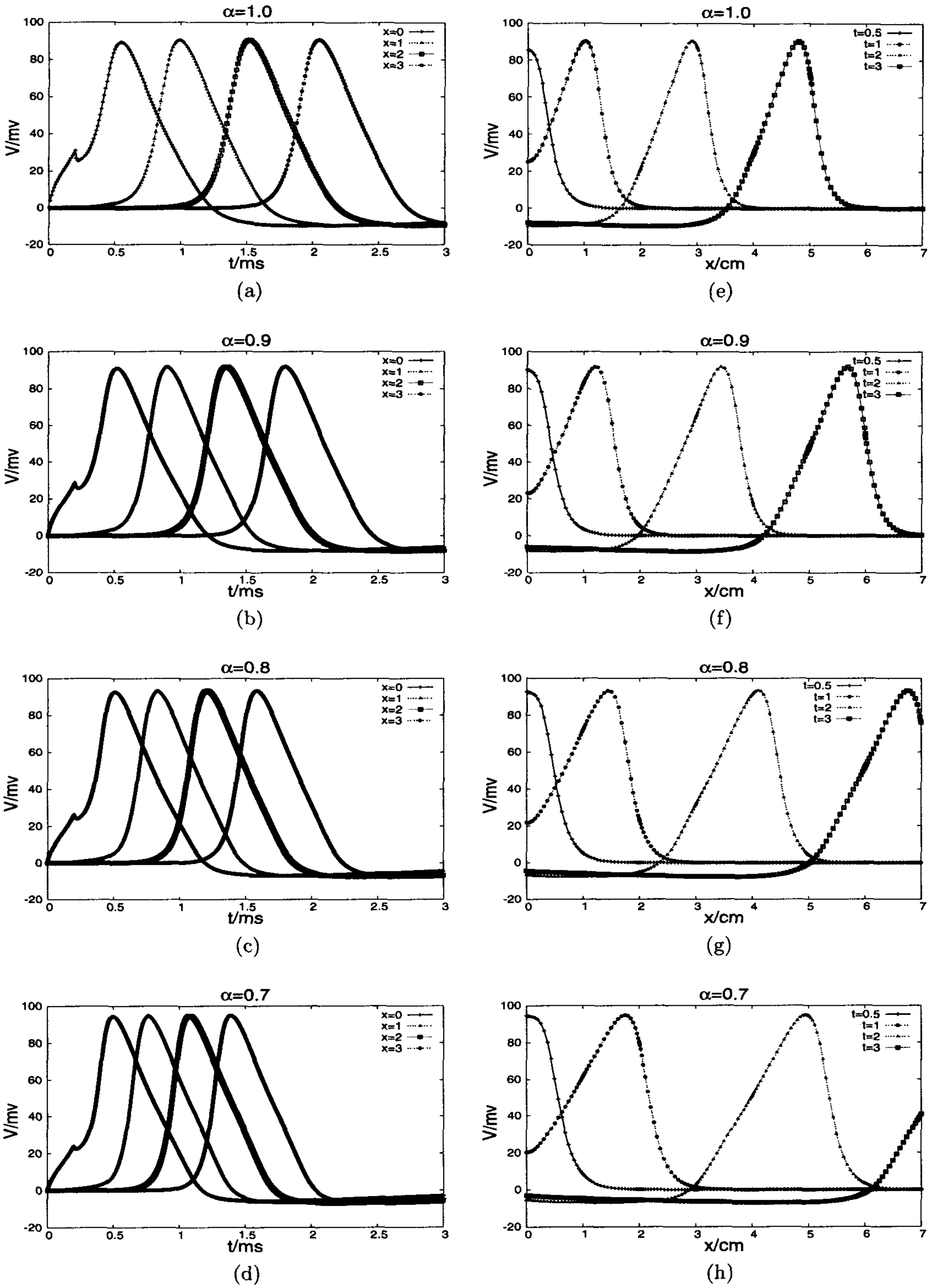


图 4:　膜电位的传导速度随 α 的变化

参考文献：

[1] Jack J J B, *et al*. Electric Current Flow in Excitable Cells[M]. Oxford: Oxford University Press, 1975

[2] Qian N, Sejnowski T J. An electro-diffusion model for computing membrane potentials and ionic concentrations in branching dendrites, spines and axons[J]. Biological Cybernetics, 1989, 62(1): 1-15

[3] Barkai E, *et al*. From continuous time random walks to the fractional Fokker-Planck equation[J]. Physical Review E, 2000, 61: 132-138

[4] Metzler R, *et al*. Anomalous transport in external fields: continuous time random walks and fractional diffusion equations extended[J]. Physical Review E, 1998, 58(2): 1621-1633

[5] Oldham K B, Spanier J. The Fractional Caculus[M]. New York: Academic Press, 1974

[6] Hodgkin A L, Huxley A F. A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve[J]. Bulletin of Mathematical Biology, 1990, 52(1): 25-71

[7] Samson E, Marchand J. Numerical solution of the extended Nernst–Planck model[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 1999, 215(1): 1-8

[8] Lin Y M, Xu C J. Finite difference/spectral approximation for the time fractional diffusion equations[J]. Journal of Computational Physics, 2007, 2(3): 1533-1552

[9] Knoll D A, Keyes D E. Jacobian-free Newton-Krylov methods: a survey of approaches and applications[J]. Journal of Computational Physics, 2004, 193: 357-397

[10] Quarteroni A, Valli A. Numerical Approximation of Partial Differential Equations[M]. New York: Springer-Verlag, 1997

[11] Kato M. Numerical analysis of the Nernst-Planck-Poisson system[J]. Journal of Theoretical Biology, 1995, 177(3): 299-304

A Finite Difference/Spectral Element Method for the Fractional Nernst-Planck Equation

LI Xian-juan, XU Chuan-ju

(School of Mathematical Sciences, Xiamen University, Xiamen 361005)

Abstract: The Nernst-Planck equation describes the flux of ions (for example, calcium, potassium, sodium, chloride, and magnesium etc.) through a diffusive membrane under the influence of both the ionic concentration gradient ∇C and electric potential ∇V. However, numerical approximations to the Nernst-Planck equation suffer from several difficulties. In this paper, we first briefly recall the derivation of the fractional Nernst-Planck equation in a cable-like geometry, which describes the anomalous diffusion in the movement of the ions in a neuronal system. Then a method combining finite differences in time and spectral element methods in space is proposed to numerically solve the underlying problem. The detailed construction and implementation of the method are presented. Our numerical experiences show that the convergence of the proposed method is exponential in space and $(2-\alpha)$-order in time. Finally, a practical problem with realistic physical parameters is simulated to demonstrate the potential applicability of the method.

Keywords: fractional Nernst-Planck equation; spectral method; finite difference method; Newton-Krylov iteration

Received: 22 May 2009. **Accepted:** 20 Dec 2009.

Foundation item: The National Natural Science Foundation of China (10531080); 973 High Performance Scientific Computation Research Program (2005CB321703); the Natural Science Foundation of Fujian Province (S0750017).